



运动晶界与调幅分解相互作用过程的相场法研究

郭灿 赵玉平 邓英远 张忠明 徐春杰

A phase-field study on interaction process of moving grain boundary and spinodal decomposition

Guo Can Zhao Yu-Ping Deng Ying-Yuan Zhang Zhong-Ming Xu Chun-Jie

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 078101 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211973

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211973>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

取向角对小角度非对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of effect of misorientation angle on low-angle asymmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2020, 69(14): 140504 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200133>

温度对小角度对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of the effect of temperature on low-angle symmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2019, 68(17): 170504 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190051>

氦泡在bcc钨中晶界处成核长大的分子动力学模拟

The nucleation and growth of Helium bubbles at grain boundaries of bcc tungsten: a molecular dynamics simulation

物理学报. 2020, 69(4): 046103 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191069>

高压下金红石相TiO₂的晶界电学性质

Grain boundary electrical characteristics for rutile TiO₂ under pressure

物理学报. 2019, 68(20): 206401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190630>

高压下纳米晶ZnS晶粒和晶界性质及相变机理

Grain and grain boundary characteristics and phase transition of ZnS nanocrystallines under pressure

物理学报. 2020, 69(14): 147202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200240>

Fe-Cr合金晶界偏析及辐照加速晶界偏析的相场模拟

Phase field simulation of grain boundary segregation and radiation-enhanced segregation in Fe-Cr alloys

物理学报. 2021, 70(11): 116101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201840>

运动晶界与调幅分解相互作用过程的相场法研究*

郭灿[†] 赵玉平 邓英远 张忠明 徐春杰

(西安理工大学材料科学与工程学院, 西安 710048)

(2021 年 10 月 24 日收到; 2021 年 11 月 16 日收到修改稿)

晶界控制的调幅分解对材料微观组织及性能有着十分重要的影响, 然而, 限于研究手段, 我们对晶界与调幅分解间相互作用过程及机制的认识仍存在不足. 本文采用相场法模拟了实际多晶体系的调幅分解过程, 研究了晶界曲率及晶界处原子扩散速率对调幅组织形貌的影响, 并讨论了调幅分解与晶界迁移的相互作用关系. 结果表明, 晶界能够促进并调制调幅组织形貌, 晶界附近为各向异性调幅组织, 晶粒内部为各向同性双连通调幅组织; 随着晶界曲率增大, 调幅组织由垂直晶界转变为平行晶界; 调幅分解速度随着晶界原子扩散系数的增大而增大, 而调幅分解过程中的晶界迁移速度则随着晶界原子扩散系数的增大表现为先减小后增大; 三维模拟结果与二维模拟结果相一致.

关键词: 调幅分解, 晶界, 曲率, 晶界迁移**PACS:** 81.30.-t, 64.75.Nx, 68.35.Rh**DOI:** 10.7498/aps.71.20211973

1 引言

调幅分解是一种很常见的固态相变机制, 其相变过程受局域自由能和成分梯度能间的竞争关系所控制, Cahn 和 Hilliard^[1] 最早建立了块体晶粒内部调幅分解动力学的基础理论. 调幅分解得到的周期性细小组织对材料的力学性能具有显著影响, 揭示其微观组织演化规律及动力学机制一直是物理、材料等领域的重要科学问题^[2-4]. 近年来, 随着微纳米尺度材料研究的兴起, 晶界对调幅分解过程的影响逐渐引起了人们的关注. Rajeshwari 等^[5]、Grön-hagen 等^[6] 与 Wise 等^[7] 发现在缺陷或晶界附近更容易发生调幅分解, 这主要是由于晶界区域易发生原子偏聚^[8], 同时晶界原子扩散速度较晶体内部更快. 此外, 界面的存在还会影响调幅组织的微观形貌, Liu 等^[9] 发现在大角晶界处的调幅分解组织形态是平行晶界的交替层片状结构, Li 等^[10,11] 的

模拟和实验结果表明相分离过程往往开始于晶界处, 再沿垂直于晶界的方向延伸至整个晶粒. 这类与晶界具有明确位向关系 (平行晶界或垂直晶界) 相分离过程称为晶界调制的调幅分解. 最近, Rajeshwari 等^[5] 提出晶界处调幅分解组织形貌与晶界的微观结构有关, Deng 等^[12] 发现晶界附近调幅分解形貌由成分梯度能及晶界能间的竞争关系所控制. 这些研究工作加深了对晶界附近调幅分解规律的认识, 然而, 由于调幅分解发生速度太快, 通过常规实验的方法很难准确捕获其相变过程, 导致我们对调幅分解-晶界间的相互作用规律及机制的认识依然有限.

随着计算机技术和数值方法的迅速发展, 计算模拟已经成为研究材料相变及微观组织演化的重要方法. 其中, 相场法 (phase-field method, PFM) 是以 Ginzburg-Landau 思想为理论基础, 在热力学基础上建立起的一个能够准确地描述系统随时间演化动力学过程的数学模型. 该方法通过自由能泛

* 国家自然科学基金 (批准号: 51801154)、陕西省高等学校学科创新引智基地项目 (批准号: S2021-ZC-GXYZ-0011) 和西安市高校重大科技创新平台及科技成果就地转化项目 (批准号: 20GXSF0003) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: cguo@xaut.edu.cn

函的对称性变化来描述相变过程, 并通过连续变化的序参量来描述泛函的对称性变化, 该方法很好地避免了复杂界面追踪问题. 同时, 相场法易于耦合其他物理场, 是材料相变研究中最常用的数值方法之一^[13-19], 并已成功地实现了调幅分解过程的数值模拟. Deng 等^[12]采用相场法研究了晶界附近调幅分解形貌的演化规律; Ramanarayan 和 Abinandanan^[20]发现晶界迁移动力学系数较大时出现垂直晶界调幅组织; Razumov 等^[21]则提出随着晶界处原子扩散速率增大调幅组织由层片状转变为液滴状; Yang 等^[22]发现小角晶界附近为垂直晶界的调幅组织, 而大角晶界附近为平行晶界调幅组织. Chen 等^[23]研究了表面应力状态对调幅分解组织的影响规律, Lee 和 Chang^[24]采用 GPU 加速相场法研究了 Fe-Cr 系统的调幅分解机制, 这些研究工作作为本文的顺利展开奠定了模型基础.

上述研究工作均提出晶界的偏析效应能够促进调幅分解, 并调制调幅组织形貌. 然而, 这些工作大多是研究固定平直晶界附近的调幅分解行为, 以及调幅组织粗化过程中与晶界的相互作用关系, 而没有考虑晶界迁移状态下的调幅分解过程. 本文采用 Ramanarayan 和 Abinandanan^[20]建立的多晶相场模型研究多晶体系晶界附近的调幅分解动力学机制, 重点讨论了曲率驱动晶界运动条件下的调幅分解组织演化规律, 以及运动晶界与调幅分解相互作用关系问题. 首先模拟了二维多晶体系的调幅分解过程, 分析了体系内不同位置调幅组织微观形貌的演化规律, 而后重点考察了晶界曲率及晶界处原子扩散速率对调幅组织形貌的影响, 并讨论了调幅分解组织与晶界运动的相互影响关系, 最后模拟了三维空间双晶晶界处的调幅分解过程. 本文的研究结果将有助于加深我们对真实多晶体系调幅分解机制的认识, 同时可为设计与调控材料微观组织、优化材料性能提供思路.

2 相场模型

系统总自由能泛函为

$$F = \int dV \left\{ f(c, \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n) + k_c (\nabla c)^2 + \sum_i k_\eta |\nabla \eta_i|^2 \right\}, \quad (1)$$

其中 c 为浓度场; η_i 是第 i 个晶粒的序参量场; $k_c = 1$ 与 $k_\eta = 1$ 为梯度项系数, 其数值与界面性质相关^[25], $f(c, \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)$ 为体自由能密度函数:

$$f(c, \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n) = Ac^2(1-c)^2 + m(c) \left[0.25 + \sum_i \left(\frac{\eta_i^4}{4} - \frac{\eta_i^2}{2} \right) + \varepsilon \sum_i \sum_{j>i} \eta_i^2 \eta_j^2 \right], \quad (2)$$

式中, $A = 1$, $\varepsilon = 20$ 为常数, $m(c) = 1 + 0.5c^2 - 2.5c^2(1-c^2)^2$ 为成分场与相场序参量的关联函数, 其形式影响晶界偏析^[20].

成分场演化的动力学方程为

$$\frac{\partial c(r, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M \nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right) + \xi_c, \quad (3)$$

式中, ξ_c 为噪声项; M 为原子扩散系数, 其表达式为

$$M = M_b + \varphi_g M_t, \quad (4)$$

式中, $M_b = 1$ 为晶内原子扩散系数; M_t 为晶界内原子扩散系数; $\varphi_g = \left[\sum_i \sum_{j>i} \eta_i^2 \eta_j^2 \right]^{1/2}$, 由于 φ_g 只在晶界处不为零, 所以晶界处原子扩散远快于晶内.

相场序参量的演化动力学方程为

$$\frac{\partial \eta_i(r, t)}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_i} \Big|_{i=1,2,3,\dots,n}, \quad (5)$$

其中 $L = 1$ 为常数. 本文的两个动力学方程均采用开源并行有限元框架 (MOOSE) 进行求解, 时间步长为 1, 空间步长为 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1$, 所有模拟均采用周期性边界条件.

3 结果与讨论

图 1 为模拟得到的多晶体系调幅分解过程的成分演化图, 计算区域为 $512\Delta x \times 512\Delta y$ 的正方形区域, 初始晶粒个数为 24, 晶粒位置及尺寸分布由随机函数给定 (见图 1(a)), 初始成分为 $c = 0.5$, 图中白色线条为晶界, 其中蓝色区域为 α 相 ($c = 0$), 红色区域为 β 相 ($c = 1$), 最右侧色条为计算区域的成分范围. 由图 1(b) 可知, 当 $t = 40$ 时, 晶界附近出现振幅较大的成分起伏而晶内成分波起伏较小, 即当存在晶界时, 调幅分解优先在晶界处发生, 这与 Raabe 等^[26]的实验结果相一致. 当 $t = 240$ 时, 晶界附近成分波振幅达到最大, 此时晶界附近调幅

分解结束而晶粒内部依然未出现调幅组织. 我们进一步发现, 晶界处的调幅组织为交替层片状排列, 主要为垂直晶界的各向异性组织, 这类由晶界调制且与晶界有明确位向关系的相分离过程我们定义为晶界调幅分解 (grain boundary-directed spinodal decomposition, G-SD). 随着演化的进行, 当 $t = 705$ 时, 晶界调制的调幅分解结束, 此时晶粒中心的成分波振幅开始随着时间增大, 当 t 达到 3000 时, 晶粒中心调幅分解过程结束, 并得到各向同性调幅组织, 后续演化过程为粗化过程. 这类晶粒内部各向同性的相分离过程为体调幅分解 (bulk spinodal decomposition, B-SD).

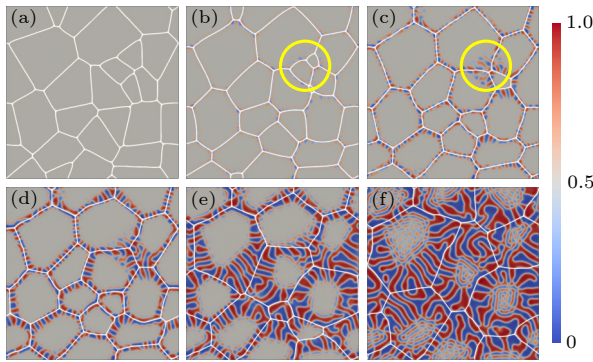


图 1 不同时刻多晶粒调幅分解过程 (a) $t = 0$; (b) $t = 40$; (c) $t = 100$; (d) $t = 240$; (e) $t = 705$; (f) $t = 1805$. 图中白色线条为晶界, 蓝色与红色区域分别代表相分离后的 α 相和 β 相

Fig. 1. The snapshots of the spinodal decomposition process of a polycrystalline system: (a) $t = 0$; (b) $t = 40$; (c) $t = 100$; (d) $t = 240$; (e) $t = 705$; (f) $t = 1805$. Note, the white line is the grain boundary, blue and red regions represent α and β phases, respectively.

此外, 对于多晶体系, 在发生调幅分解的过程中还伴随着晶界迁移以及晶粒长大过程. 演化初期, 部分大曲率晶界的迁移速度远高于调幅分解速度, 此时晶界对调幅分解的影响较弱, 而未观测到调幅组织与晶界有特定的位向关系, 如图 1(a)—1(c) 中黄色圆圈部分所示. 而具有较低迁移速率晶界附近的调幅组织与晶界具有明确的位向关系, 主要为垂直晶界的层片状结构, 见图 1(c) 和图 1(d), 同时调幅分解不断随着晶界运动而连续在晶界处发生, 见图 1(d) 和图 1(e). 需要注意的是, 图 1(e) 及图 1(f) 中与晶界相距较远位置的层片状组织同样受晶界调制作用, 这类与晶界有确定位向关系的调幅组织均为 G-SD. 随着演化的进行, 晶界逐渐被调幅组织包住, 此时受成分波的钉扎作用, 晶界

迁移速度极大降低, 此后发生的调幅分解为组织各向同性的 B-SD, 见图 1(f). 综上所述, 对于真实体系晶界附近的调幅分解过程还要考虑晶界迁移的影响.

为了进一步探讨运动晶界对调幅分解的影响规律, 模拟了不同晶界曲率条件下的调幅分解过程, 结果如图 2 所示. 计算区域为 $400\Delta x \times 128\Delta y$ 的矩形区域, 初始晶粒个数为 2 个, 晶界为图中白色曲线, 初始曲率半径分别为: $r = 30$ (图 2(a)), $r = 60$ (图 2(b)), $r = 70$ (图 2(c)), 晶界扩散系数为 $M_t = 500$, 初始成分为 $c = 0.5$, 每行图片下方色条为成分范围. 当 $r = 30$ 时, 晶界在曲率驱动下迅速消失, 中心晶粒内的调幅组织为与初始晶界平行的同心环状组织 (即 G-SD), 外部晶粒为调幅组织各向同性的 B-SD. 由于晶界的偏聚效应对调幅分解具有促进作用, 中心晶粒内的调幅分解速度较外部晶粒快, 这与图 1 中的结果相一致. 进一步观察其成分场演化过程发现, 当晶界迁移速度较快时晶界迁移轨迹上形成一系列平行晶界的成分波, 晶界消失后平行晶界的成分波会在梯度能的作用下发生粗化, 并最终演化为平行初始晶界的调幅组织 [12].

随着曲率半径增大, G-SD 的形貌逐渐由平行晶界转变为垂直晶界, 当 $t = 2475$ 调幅分解结束时外部晶粒为各向同性的调幅组织, 内部晶粒为辐射状的交替层片组织 (见图 2(b)). 由图 2(b) 可知, 当 $t = 114$ 时, 晶界附近调幅组织的成分波已达到最大振幅, 此时部分调幅组织垂直晶界, 部分调幅组织平行晶界. 其中垂直部分的晶界位于调幅组织前端, 而平行部分的晶界位于两个层片的中心, 由于前者晶界前的成分波振幅远小于后者, 成分场钉扎作用的差异进一步导致不同部位晶界的迁移速度出现差异, 进而使得晶界不再是圆形. 图 2(b) 中出现部分平行晶界组织主要是由于随着晶界向着曲率中心迁移, 晶界曲率半径不断减小, 垂直晶界生长的调幅组织层片数目将通过层片湮灭的方式减少层片数目, 当调幅分解速率较慢时则层片间距调整较为困难, 此时相邻层片发生合并形成部分平行晶界组织. 随着演化进行, 晶界曲率不断增大, 进而晶界迁移速度不断增大, 最终晶界与已完成相分离的 G-SD 组织脱离, 见图 2(b) 中的 $t = 193-225$, 后续调幅分解过程与 2(a) 相近. 当曲率半径增大到 70 时, 部分晶界处于计算区域外部, 由于采用了周期性边界条件, 导致边界处实际曲率与中心部

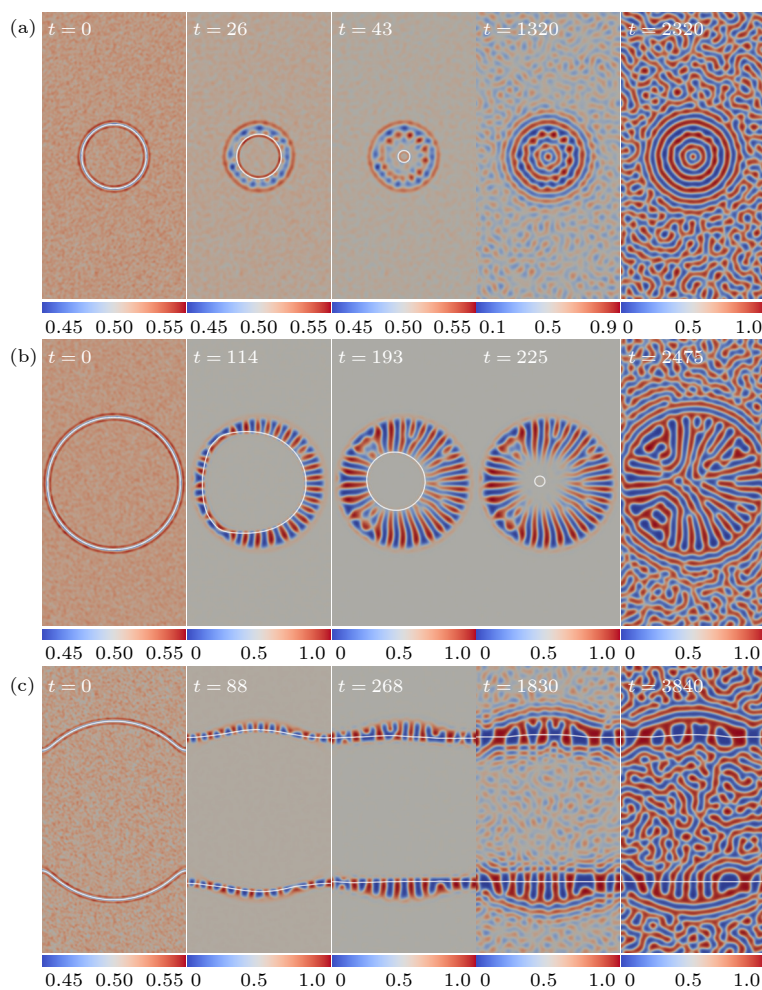


图 2 不同初始曲率半径条件下的调幅分解过程 (a) $r = 30$; (b) $r = 60$; (c) $r = 70$

Fig. 2. Snapshots of the spinodal decomposition processes with different radius of curvatures: (a) $r = 30$; (b) $r = 70$; (c) $r = 70$.

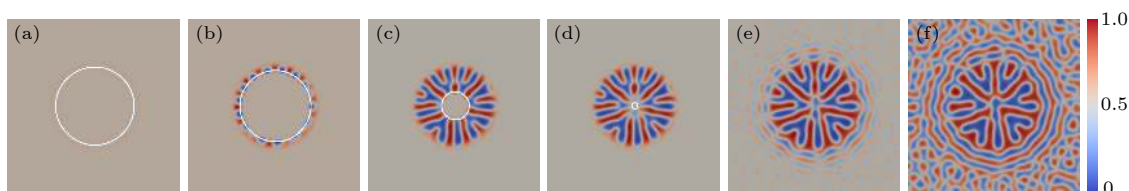


图 3 初始晶粒半径为 30, 晶界原子扩散常数 $M_t = 5000$ 时的调幅分解过程 (a) $t = 0$; (b) $t = 10$; (c) $t = 36$; (d) $t = 41$; (e) $t = 1062$; (f) $t = 2008$

Fig. 3. The snapshots of the spinodal decomposition processes with initial $r = 30$ (radius of curvature) and $M_t = 5000$ (the diffusional constant inside the grain boundary): (a) $t = 0$; (b) $t = 10$; (c) $t = 36$; (d) $t = 41$; (e) $t = 1062$; (f) $t = 2008$.

位曲率反向. 此时, 随着演化进行, 弯曲晶界逐渐转变为平直结构, 晶界迁移停止, 最终只有部分晶界运动区域为垂直晶界的 G-SD, 其他区域为 B-SD. 随后进一步模拟了曲率半径为 10, 20, ..., 80 时的调幅分解过程, 发现当 $r \leq 30$ 时调幅组织平行初始晶界, 当 r 介于 30 到 70 之间时为部分垂直部分平行初始晶界的调幅组织, 当 r 大于 70 时调幅组织垂直初始晶界.

上述结果表明, 当晶界迁移速率较小时, 晶界附近的调幅分解完成程度较高, 为垂直晶界的层片状组织, 而当晶界迁移速率较大时, 晶界偏析效应诱发的成分波在梯度能驱动下形成平行原始晶界的层片状组织, 即调幅分解的组织形貌受晶界迁移速率以及调幅分解速率共同控制. 进一步, 通过增大晶界处原子扩散系数来增加调幅分解速度, 图 3 为初始晶粒半径为 30, $M_t = 5000$ 时的成分场演

化过程, 其他计算参数与图 2(a) 相同. 由图 3 可知, 初始时刻的调幅分解仍然择优在晶界处发生, 并表现为与图 2(a) 相似的沿晶界周期性成分波. 不同点在于, 当晶界处原子扩散系数 M_t 增大到 5000 时会加速调幅分解过程, $t = 10$ 时刻该成分波已达到其最大振幅. 后续演化过程中, 调幅组织的拓展方向与晶界迁移同步且同向进行, 并最终形成垂直原始晶界的组织形貌. 综上可知, 当晶界迁移速率较低或晶界原子扩散系数较大时容易得到垂直原始晶界的调幅组织.

此外, 通过对比图 2(a) 与图 3 中的晶界迁移情况, 发现晶界处原子扩散系数会影响调幅分解动力学过程进而影响晶界迁移过程. 图 4 为统计得到的不同 M_t 条件下晶界迁移速率 (V) 与晶界半径倒数 ($1/r$) 间的关系曲线, 图 5 为不同扩散速率条件下通过曲率中心某直线上的成分场随时间的变化曲线, 图中红色与黑色曲线交界为晶界位置. 由图 4 可知, 当 M_t 等于 0 时, 晶界迁移速率 (V) 与晶界半径倒数 ($1/r$) 为线性关系, 此时调幅分解与晶界运动完全脱耦为纯曲率驱动的晶界迁移过程^[27], 这是由于此类条件下运动晶界对调幅分解的促进作用较弱, 小振幅成分波对晶界的阻碍作用有限 (见图 5). 对比不同扩散系数下的 V - $1/r$ 曲线可知, 晶界迁移速度均随着曲率增大而增大, 这符合曲率驱动晶界运动的一般规律. 当 $M_t > 1750$ 时, 在整个演化过程中晶界迁移速度与晶界半径倒数为线

性关系, 其斜率与 M_t 等于 0 时相近, 此时 G-SD 组织与晶界迁移方向同向并垂直晶界; 当 $0 < M_t < 1750$ 时, 相同曲率条件下晶界迁移速度较 $M_t = 0$ 及 $M_t > 1750$ 时小, 同时 V - $1/r$ 曲线斜率不再是常数, 此时 G-SD 组织部分平行初始晶界部分垂直初始晶界. 由图 5 可知, 当 $M_t = 1000$ 时, 晶界前的成分波振幅较大, 原子富集效应会阻碍晶界运动, 甚至完全钉扎住晶界, 如图 2(b) 中所示, 直到局部曲率进一步增大到能克服钉扎力时, 晶界继续迁移. 而当 $M_t = 1750$ 时, 晶界前的成分波振幅与 $M_t = 0$ 时相当, 成分波对晶界的阻碍效应有限, 晶界运动情况与 $M_t = 0$ 时相同. 我们认为晶界前的成分波一部分是源于调幅分解 (B-SD), 更重要的

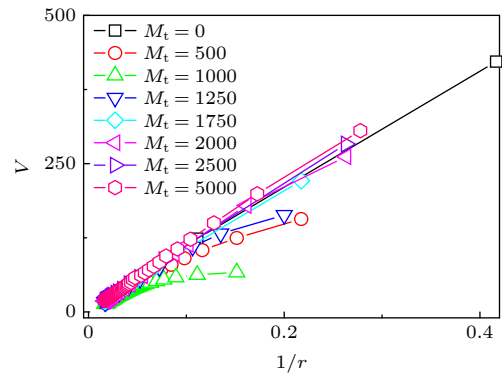


图 4 不同 M_t 条件下晶界迁移速率 (V) 与晶界半径倒数 ($1/r$) 间的关系曲线

Fig. 4. The grain boundary migration velocity (V) versus the grain boundary curvature ($1/r$) with different M_t .

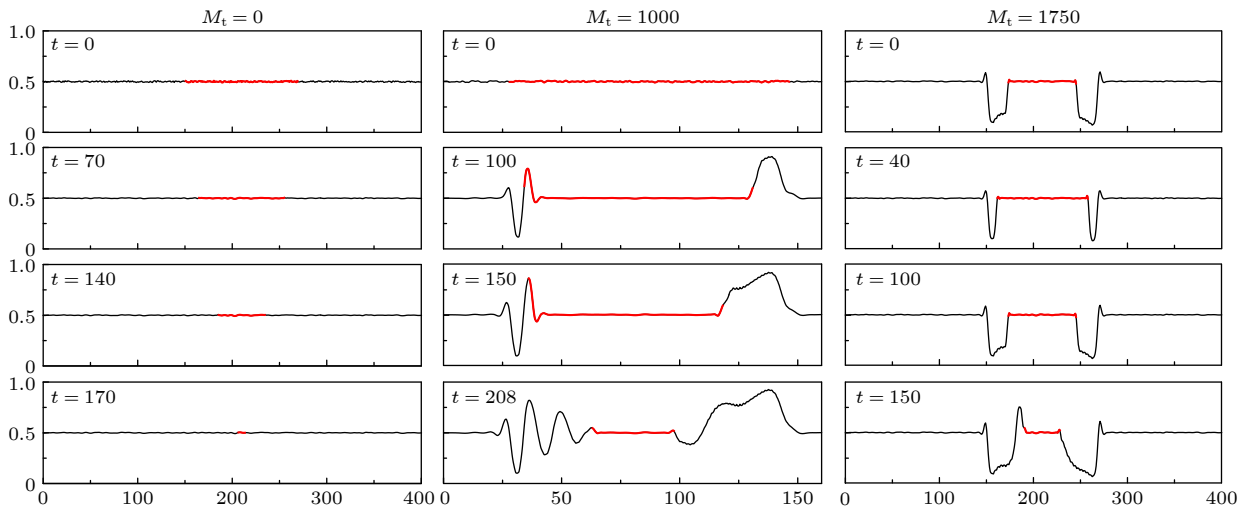


图 5 不同扩散系数 (M_t) 条件下穿过曲率中心某直线上的成分场随时间演化曲线, 图中红色曲线代表中心晶粒成分场, 黑色曲线代表外部晶粒成分场

Fig. 5. Temporal evolution of the composition fields along the line that across the center of the grain with different initial M_t , where the red and black lines represent the composition field of central grain and external grain, respectively.

一部分是源于某一相原子在晶界处发生偏聚而导致晶界前沿出现原子富集, 并且成分波振幅会随着 M_t 的增大而增大, 见图 5, 进而导致晶界迁移速率随 M_t 的增大而降低. 当 M_t 进一步增大到 1750 时, 晶界偏聚速度进一步加剧导致成分波振幅迅速增大, 此时成分波会在梯度能的驱动下由平行晶界转变为垂直晶界, 从而降低晶界前原子富集程度.

进一步, 模拟了不同 M_t 条件下三维空间晶界存在条件下的调幅分解过程, 图 6(a) 中 $M_t = 5000$, 图 6(b) 为 $M_t = 500$, 图中计算区域为 $80\Delta x \times 80\Delta y \times 80\Delta z$ 的立方区域, 初始晶粒个数为 2 个, 晶界为图中白色曲面, 初始曲率半径 35, 其中第一行为三维视图, 第二行为 $x = 40\Delta x$ 位置处的二维截面图. 由图 6(a) 可知, 调幅分解首先在晶界位置发生, 较大晶界扩散系数条件下得到垂直晶界的组织, 小晶界扩散系数条件下得到平行初始晶界的调幅组织 (呈同心球壳状分布, 见图 6(a)), 这与前面的二维模拟过程相一致.

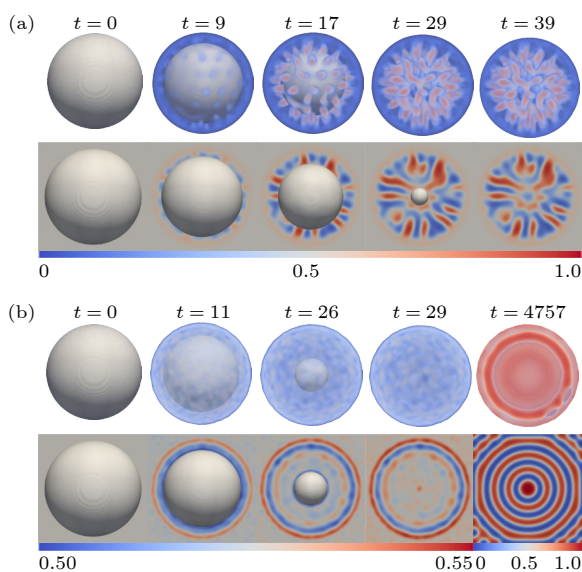


图 6 中心晶粒半径为 35, 不同 M_t 条件下双晶体系调幅分解过程 (a) $M_t = 5000$; (b) $M_t = 500$. 其中, 每组图片中上一行为三维视图, 第二行为 $x = 40\Delta x$ 处的二维视图, 灰色球面为晶界

Fig. 6. Snapshots of the spinodal decomposition processes with different M_t for $r = 35$: (a) $M_t = 5000$; (b) $M_t = 500$. Where the 5 figures in the upper row of Fig. 6(a) and Fig. 6(b) are the time evolution of the composition field in three-dimension, the 5 figures in the lower row of Fig. 6(a) and Fig. 6(b) are the two-dimensional cross-sectional view of the composition field at $x = 40\Delta x$, and the gray sphere is the grain boundary.

4 结 论

本文采用多晶相场模型模拟了二维多晶、双晶以及三维双晶条件下的调幅分解过程, 研究了晶界曲率及晶界处原子扩散速率对调幅组织形貌的影响, 并讨论了调幅分解与晶界运动间的相互影响关系. 结果表明, 晶界能够促进并调制调幅组织形貌, 晶界附近为各向异性调幅组织, 晶粒内部为各向同性双连通调幅组织, 这与模拟及实验结果相一致. 当晶界曲率半径较小时, 晶界迁移速度较快, 成分波在梯度能的驱动下演变为平行晶界的调幅组织; 当曲率半径较大时, 调幅组织为垂直晶界的调幅组织. 当晶界处原子扩散系数较大时, 晶界运动与 G-SD 同步进行, 此时调幅分解速度较快得到垂直晶界的调幅组织, 晶界迁移速度与曲率呈线性关系; 当晶界扩散系数较小时, 调幅分解速度较慢, 此时晶界运动与 G-SD 不完全同步, 晶界迁移受到成分波的钉扎作用, 晶界迁移速度与曲率偏离线性关系. 进一步, 我们模拟了三维空间双晶调幅分解过程, 得到了与二维模拟相一致的结果.

参考文献

- [1] Cahn J W, Hilliard J E 1958 *J. Chem. Phys.* **28** 258
- [2] Liu X, Li R, Lu Y, Zhang Y, Yu P, Li G 2021 *Mater. Sci. Eng. A* **822** 141674
- [3] Peng Y, Wang N 2020 *J. Mater. Sci. Technol.* **38** 64
- [4] Das A, Basak C B 2018 *Philos. Mag.* **98** 3007
- [5] Rajeshwari K S, Sankaran S, Hari Kumar K C, Rösner H, Peterlechner M, Esin V A, Divinski S, Wilde G 2020 *Acta Mater.* **195** 501
- [6] Grönhammar K, Ågren J, Odén M 2015 *Scr. Mater.* **95** 42
- [7] Wise S M, Kim J S, Johnson W C 2005 *Thin Solid Films* **473** 151
- [8] Li L, Li Z, Kwiatkowski da Silva A, Peng Z, Zhao H, Gault B, Raabe D 2019 *Acta Mater.* **178** 1
- [9] Liu J, Wu X, Lennard W N, Landheer D, Dharma-Wardana M W C 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 123510
- [10] Li Y S, Li S X, Zhang T Y 2009 *J. Nucl. Mater.* **395** 120
- [11] Li Y, Katsui H, Goto T 2017 *Mater. Today:Proc.* **4** 11449
- [12] Deng Y Y, Guo C, Wang J C, Liu Q, Zhao Y P, Yang Q 2021 *Chin. Phys. B* **30** 088101
- [13] Sun J, Li X X, Zhang J H, Wang G, Yang M, Wang H, Xu D S 2020 *Acta Metall. Sin.* **56** 1113 (in Chinese) [孙佳, 李学雄, 张金虎, 王刚, 杨梅, 王峰, 徐东生 2020 *金属学报* **56** 1113]
- [14] Wang J C, Guo C W, Li J J, Wang Z J 2018 *Acta Metall. Sin.* **54** 657 (in Chinese) [王锦程, 郭春文, 李俊杰, 王志军 2018 *金属学报* **54** 657]
- [15] Guo C, Kang C, Xu C, Wang J 2021 *Comput. Mater. Sci.* **196** 110536
- [16] Guo C, Wang J, Li J, Wang Z, Huang Y, Gu J, Lin X 2018

- Acta Mater.* **145** 175
- [17] Tu Z, Zhou J, Tong L, Guo Z 2020 *J. Cryst. Growth* **532** 125439
- [18] Qi K W, Zhao Y H, Tian X L, Peng D W, Sun Y Y, Hou H 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 140504 (in Chinese) [祁科武, 赵宇宏, 田晓林, 彭敦维, 孙远洋, 侯华 2020 物理学报 **69** 140504]
- [19] Zhu C S, Hu Z, Wang K M 2020 *Chin. Phys. B* **29** 034702
- [20] Ramanarayan H, Abinandanan T A 2003 *Acta Mater.* **51** 4761
- [21] Razumov I K, Gornostyrev Y N, Yermakov A Y 2007 *J. Alloys Compd.* **434–435** 535
- [22] Yang T, Chen Z, Zhang J, Dong W P, Wu L 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 078103
- [23] Seol D J, Hu S Y, Li Y L, Shen J, Oh K H, Chen L Q 2003 *Acta Mater.* **51** 5173
- [24] Lee J, Chang K 2019 *Comput. Mater. Sci.* **169** 109088
- [25] Guo C, Wang J, Wang Z, Li J, Guo Y, Huang Y 2016 *Soft Matter* **12** 4666
- [26] Kwiatkowski da Silva A, Kamachali R D, Ponge D, Gault B, Neugebauer J, Raabe D 2019 *Acta Mater.* **168** 109
- [27] Guo Y L 2015 *Ph. D. Dissertation* (Xi'an: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese) [郭耀麟 2015 博士学位论文 (西安: 西北工业大学)]

A phase-field study on interaction process of moving grain boundary and spinodal decomposition*

Guo Can[†] Zhao Yu-Ping Deng Ying-Yuan
Zhang Zhong-Ming Xu Chun-Jie

(School of Materials Science and Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

(Received 24 October 2021; revised manuscript received 16 November 2021)

Abstract

The grain boundary-directed spinodal decomposition has a substantial effect on the microstructure and properties of polycrystalline materials. However, due to the fact that the spinodal decomposition is usually too fast to be captured in experiments, our understanding of the grain boundary-directed spinodal decomposition process is still very limited. In this work, we simulate the spinodal decomposition process of a polycrystalline system by the phase-field model, check the influences of the curvature and the atom diffusion constant inside the grain boundary (M_t) on the phase decomposition patterns, and discuss the interaction between the moving grain boundaries and spinodal decomposition. The simulation results indicate that the velocity of spinodal decomposition near the grain boundary is faster, and the spinodal morphology at the grain boundary presents the anisotropic bicontinuous microstructures different from the isotropic continuous microstructures in the bulk phase. Further, we find that the spinodal pattern is parallel to the grain boundaries with larger curvatures, and it will perpendicular to the grain boundaries with smaller curvatures. We also find that the spinodal decomposition velocity increases with the augment of M_t , while the grain boundary migration velocity will first decrease and then increase with the augment of M_t under the effect of spinodal decomposition. Finally, we simulate the spinodal decomposition process of two-grain system in three dimensions, and we obtain the results consistent with the two-dimensional simulations.

Keywords: spinodal decomposition, grain boundary, curvature, grain boundary migration

PACS: 81.30.-t, 64.75.Nx, 68.35.Rh

DOI: 10.7498/aps.71.20211973

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51801154), the Higher Education Institution Discipline Innovation and Intelligence Base of Shaanxi Province, China (Grant No. S2021-ZC-GXYZ-0011), and the Projects of Major Innovation Platforms for Scientific and Technological and Local Transformation of Scientific and Technological Achievements of Xi'an, China (Grant No. 20GXSF0003).

[†] Corresponding author. E-mail: cguo@xaut.edu.cn